

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЛИНЕЙНО- ЦЕПОЧНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ПОКРЫТИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ И МЕДИ

Бокизода Д.А.<sup>1\*</sup>, Зацепин А.Ф.<sup>1</sup>, Бунтов Е.А.<sup>1</sup>, Гусева М.Б.<sup>2</sup>,  
Парулин Р.А.<sup>1</sup>, Ошева Д.К.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России  
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2)</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия

\*E-mail: [bobot92@mail.ru](mailto:bobot92@mail.ru)

## MODELING OF OPTICAL PROPERTIES OF LINEAR-CHAIN CARBON COATINGS ON SILICON AND COPPER SURFACE

Boqizoda D.A.<sup>1\*</sup>, Zatsepin A.F.<sup>1</sup>, Buntov E.A.<sup>1</sup>, Guseva M.B.<sup>2</sup>,  
Parulin R.A.<sup>1</sup>, Osheva D.K.<sup>1</sup>

<sup>1)</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2)</sup> Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

**Abstract.** The work is aimed to combine the experimental and calculated Raman spectra for the straight and helical carbyne crystal structural model. The influence of (100), (110) and (111) Cu AND Si substrates is taken into account. DFT calculations establish the dependence between chain structure, phonon frequencies and Raman susceptibilities, giving interpretation to experimental Raman bands. As a sample system, we used the 20 – 400 nm films of chains on copper substrate synthesized by ion-assisted condensation in a high vacuum where the flows of carbon and Ar gas ions impinge on the substrate.

Синтез чистого кристалла карбина или длинных изолированных углеродных цепей представляет собой серьезную технологическую проблему из-за неустойчивости  $sp^1$ -углерода. По указанным причинам производство макроскопического карбина до сих пор не было продемонстрировано. Одним из возможных путей синтеза является ионная конденсация карбиноподобных линейных  $sp^1$ -углеродных цепей (ЛЦУ), упорядоченных в гексагональной структуре с мецепочечным расстоянием 0,5 нм. ЛЦУ был получен экспериментально и изучен множеством методов [1]. Главная проблема заключается в отсутствии техники быстрой аттестации, подтверждающей структуру нового материала. В то же время метод комбинационного рассеяния способен обнаруживать углеродные цепи и отражает их структурные особенности [2].

Целью настоящей работы является совмещение экспериментального и расчетного спектров комбинационного рассеяния для линейной и винтовой структурной модели кристалла карбина. Учитывается влияние медных и кремниевых подложек с ориентацией (100), (110) и (111). Расчеты методом DFT позволили установить зависимость между структурой углеродных цепей, фононными частотами и интенсивностью КРС, что обеспечивает возможность интерпретации экспериментальных полос КР. В качестве системы образцов мы

использовали пленки 20 - 400 нм цепей на медной подложке, синтезированные с помощью ионной конденсации в высоком вакууме, где совмещение пучков ионов углерода и аргона обеспечивает рост пленки гексагонально упакованных  $sp^1$ -цепей.

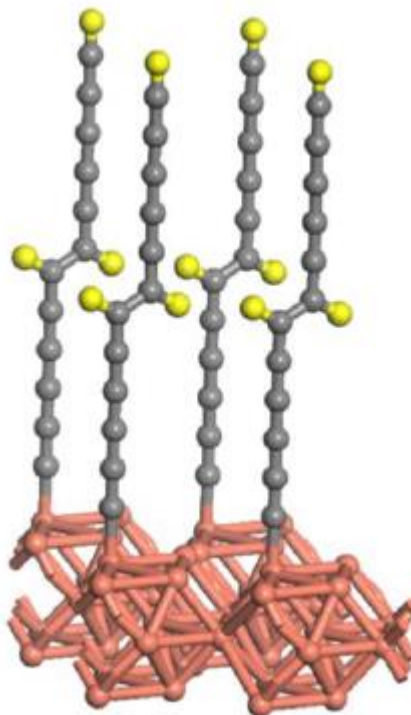


Рис. 1. Упрощенная модель структуры пленки линейно-цепочечного углерода (12 атомов углерода, длинная серая цепь поверх 3 слоев коричневой меди). Возможные примеси водорода показаны желтым цветом.

1. С.Н. Wong et al. Carbon, 114, pp. 106-110 (2017).
2. Е.А. Buntov et al. Carbon, 117, pp. 271-278 (2017).